

パウリ作用素のスペクトル解析に基づく超格子構造の解析

著者	小栗栖 修
著者別表示	Ogurisu Osamu
雑誌名	平成19(2007)年度 科学研究費補助金 基盤研究(C) 研究成果報告書
巻	2005-2007
ページ	44p.
発行年	2008-04
URL	http://doi.org/10.24517/00049913



パウリ作用素のスペクトル解析に基づく 超格子構造の解析

1 7 5 4 0 1 9 1

平成17年度～平成19年度科学研究費補助金
(基盤研究(C)) 研究成果報告書

平成20年4月

金沢大学附属図書館



1300-04651-1

研究代表者 小栗栖 修

金沢大学大学院自然科学研究科准教授

著 者 寄贈

平成17年度～平成19年度科学研究費補助金（基盤研究（C））

研究成果報告書

1. 研究課題 パウリ作用素のスペクトル解析に基づく超格子構造の解析

2. 課題番号 17540191

3. 研究組織

研究代表者 小栗 栖 修 （金沢大学自然科学研究科准教授）

研究協力者 浅倉 邦彦 （米子工業高等専門学校准教授）

真田 博文 （北海道工業大学准教授）

鈴木 正清 （北見工業大学教授）

4. 交付決定額（配分額）

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合 計
平成17年度	1,200,000	0	1,200,000
平成18年度	700,000	0	700,000
平成19年度	700,000	210,000	910,000
総 計	2,600,000	210,000	2,810,000

5. 研究発表

(1) 学会誌等

● 査読有

1. Osamu Ogurisu, *On the Numbers of Negative Eigenvalues of a Schrödinger operator with Point Interactions and Points of Interaction with Negative Intensities*, Lett. Math. Phys. に投稿中.
2. Kunihiro Asakura, Hirofumi Sanada, Osamu Ogurisu and Masakiyo Suzuki, *Practical Band Estimation for Periodic Superlattices by Using Semi-Infinite Periodic model*, Proceedings of 7th International Symposium on Communication and Information Technologies 2007 (ISCIT 2007), 932–935, 2007.
3. Kunihiro Asakura, Hirofumi Sanada, Osamu Ogurisu and Masakiyo Suzuki, *Real-Passband Estimation for Modulated Superlattices Based on Circuit Theory*, Proceedings of International Symposium on Intelligent Signal Processing and Communication Systems (ISPACS 2006), 415–418, 2006.

● 査読無

1. 浅倉邦彦、小栗栖修、真田博文、鈴木正清, 映像インピーダンスを利用した変調超格子の準通過域情報の抽出, 電子情報通信学会総合大会講演論文集基礎・境界, A-1-33, 10-10, 2008.
2. 浅倉邦彦、小栗栖修、真田博文、鈴木正清, 回路理論の応用による変調超格子の準通過域形成に関する一考察, IEICE Technical Report, CAS2007-84(2008-01), 49–54, 2008.
3. 浅倉邦彦、真田博文、小栗栖修、鈴木正清, 映像パラメータを利用した半導体超格子の実践的バンド推定法, 電子情報通信学会ソサエティ大会講演論文集基礎・境界, A-1-10, 10-10, 2007.
4. 浅倉邦彦、小栗栖修、真田博文、鈴木正清, δ -型ポテンシャルを利用した変調超格子のエネルギー透過特性, 平成 18 年度 電気・情報関連学会中国支部連合大会講演論文集, p294, 2006.
5. 浅倉邦彦、小栗栖修、真田博文、鈴木正清, 回路理論を利用した層幅変調超格子のバンド構造の推定法, IEICE Technical Report, (CAS2005-46 NLP2005-59) (2005-59), p73–77, 2005.

(2) 口頭発表

1. 招待講演

「半導体超格子の形成するミニバンド構造の性質

～作用素論的な視点、回路理論的な視点～」

電子情報通信学会北海道支部主催講演会、北見工業大学、2005 年 12 月.

2. 浅倉邦彦、小栗栖修、真田博文、鈴木正清, 映像インピーダンスを利用した変調超格子の準通過域情報の抽出, 電子情報通信学会総合大会、北九州学術研究都市、2008 年 3 月.
3. 浅倉邦彦、小栗栖修、真田博文、鈴木正清, 回路理論の応用による変調超格子の準通過域形成に関する一考察, 電子情報通信学会 回路とシステム研究会 (CAS)、沖縄青年会館、2008 年 2 月.
4. Kunihiro Asakura, Hirofumi Sanada, Osamu Ogurisu and Masakiyo Suzuki, *Practical Band Estimation for Periodic Superlattices by Using Semi-Infinite Periodic model*, 7th International Symposium on Communication and Information Technologies 2007 (ISCIT 2007), Sydney, 2007 年 11 月.
5. 浅倉邦彦、真田博文、小栗栖修、鈴木正清, 映像パラメータを利用した半導体超格子の実践的バンド推定法, 電子情報通信学会ソサエティ大会、鳥取大学、2007 年 9 月.
6. Kunihiro Asakura, Hirofumi Sanada, Ogurisu Osamu, Masakiyo Suzuki. *Real-Passband Estimation for Modulated Superlattices Based on Circuit Theory* International Symposium on Intelligent Signal Processing and Communication Systems (ISPACS 2006), 米子, 2006 年 12 月.

6. 研究成果と関連資料

目次

1. 有限個のデルタポテンシャルをもつ一次元シュレーディンガー作用素の固有値の個数について
2. 正規な木グラフのグリーン関数について
3. 細分グラフの固有値の挙動と元のグラフの次数の分布について
4. 電子情報通信学会北海道支部主催講演会、招待講演の概要
5. 映像インピーダンスを利用した変調超格子の準通過域情報の抽出
6. 回路理論の応用による変調超格子の準通過域形成に関する一考察
7. Practical Band Estimation for Periodic Superlattices by Using Semi-Infinite Periodic model
8. 映像パラメータを利用した半導体超格子の実践的バンド推定法
9. Real-Passband Estimation for Modulated Superlattices Based on Circuit Theory
10. 回路理論を利用した層幅変調超格子のバンド構造の推定法
11. δ -型ポテンシャルを利用した変調超格子のエネルギー透過特性

有限個のデルタポテンシャルをもつ一次元シュレーディンガー作用素の固有値の個数について

小栗栖 修 (金沢大学)

第1章 問題の背景と新しい結果

一次元の自由なシュレーディンガー作用素 $-d^2/dx^2$ は、よく知られているとおり、 $[0, \infty)$ をそのスペクトルとし、また絶対連続なスペクトルしか持たない。これになんらかのポテンシャル関数 V による相互作用を添加したシュレーディンガー作用素 $-d^2/dx^2 + V$ のスペクトルの構造を決定することは、関数解析における基本的な問題の一つである。

ここで扱う δ 相互作用とは、形式的にはポテンシャル関数が次のようなディラックのデルタ関数の線形和で与えられる場合をいう。

$$V(x) = \sum_{y \in X} \alpha_y \delta(x - y).$$

ここで、 $X \subset \mathbb{R}$ は相互作用点の集合であり、高々可算の場合を考えることがおおい。また、係数 α_y を（相互作用点 y での）強度と呼ぶ。係数 α_y は $[-\infty, \infty]$ の値を取る。この場合のシュレーディンガー作用素を記号

$$L_{X, \alpha} = -d^2/dx^2 + V$$

であらわすことにしよう。この作用素 $L_{X, \alpha}$ の自己共役性の問題は詳細が十分に調べられている。なお、デルタ関数と関数の積はそのままでは意味を持たないが、強度を相互作用点での結合条件として厳密な定義が可能である（詳細は次章）。この文章では扱わない例だが、 $\alpha_y = \infty$ のときは点 y でディリクレ境界条件を課したことに同じことになる。

この δ 相互作用は、 X が可算無限集合の場合、例えば $X = \{x_i = id; i \in \mathbb{Z}\}$ のとき、強度 α_i がある周期を持つ場合、ある種の結晶構造に対応してエネルギーのバンド構造に対応するスペクトルがあらわれるなど、興味深い。

一方、 X が有限集合 $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ の場合、 V は $-d^2/dx^2$ に対して有限階数の摂動にすぎないので、連続スペクトルは不変でありバンド構造は現れない。しかし、摂動の階数を個数の上限として離散固有値が出現する可能性がある。実際、強度がすべて負の値のとき、強度が十分大きい相互作用点同士が互いに十分に離れている場合には、相互作用点の個数 n と負の固有値の個数 N が一致することが知られている。S. Albeverio と L. Nizhnik は、[1] において $N = n$ となる必要十分

条件を、すべての強度が負の場合に与えている。さらに [2] において強度と相互作用点との距離から N を計算する明解なアルゴリズムを得て、 $L_{X,\alpha}$ が負の固有値をひとつも持たない必要十分条件をも与えている。

この文章では、[1] と異なり、強度がすべて負とは限らないで、 N の個数を計算することを目標とする。数値計算などの経験上、強度が十分大きい相互作用点が互いに十分に離れている場合には、 N の値は負の強度を持つ相互作用点の個数 m に等しいのだが、 $N = m$ となる簡潔な必要条件も十分条件も知られていない。

補足しておく、[2] のアルゴリズムを使えば、原理的にはいかなる場合にも N の値を計算することが可能である。しかしながら、現実的には n が大きい場合には多量の計算が必要であり、強度がどの程度大きければ十分大きいことになるのかなどの条件を一般的に得ることは難しい。

今回、 $L_{X,\alpha}$ が少なくとも m 個の負の固有値を持つ十分条件を一般的な形で得て (Lemma 1)、それを基礎にした $N \geq m$ となるのに十分な簡潔な判定方法を2つ得た (Theorem 2 と Proposition 3) ので、それを報告する。

第2章 δ -相互作用をもつ一次元シュレーディンガー作用素

まず [2] の一次元シュレーディンガー作用素の定義を確認しよう。 $X = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbf{R}^n$ を相互作用点 (points of interaction) の集合とし、各点での相互作用の強度を $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n) \in \mathbf{R}^n$ とする。この δ -相互作用をともなう一次元のシュレーディンガー作用素 $L_{X,\alpha}$ は、ソボレフ空間 $W_2^2(\mathbf{R}^1 \setminus X)$ に属する関数 $\psi(x)$ に対して微分表現 $-(d^2/dx^2)$ で作用し、集合 X 上の点では次の結合条件

$$\begin{aligned}\psi(x_k + 0) &= \psi(x_k - 0), \\ \psi'(x_k + 0) - \psi'(x_k - 0) &= \alpha_k \psi(x_k)\end{aligned}$$

を満たすものとして定義する。このシュレーディンガー作用素 $L_{X,\alpha}$ は次のような表現を持つ:

$$L_{X,\alpha}\psi(x) = \left[-\frac{d^2}{dx^2} + \sum_{k=1}^n \alpha_k \delta(x - x_k) \right] \psi(x),$$

ここで、 δ はディラックのデルタ関数である。 $\alpha_i \neq 0$ 、さらに $x_i \neq x_j$ ($i \neq j$) としても、一般性を失わないので、以下ではこれらを仮定しておく。

[2] でも述べられているように、この作用素 $L_{X,\alpha}$ は $L^2(\mathbf{R}^1)$ 上の自己共役作用素である。この作用素のスペクトルは正の実軸を含み、絶対連続であり、 n 個以上の負の固有値を持たない。また固有値を持てば、それは必ず単純である。これらの負の固有値を $-\lambda^2$, $\lambda > 0$ と表現すると、次の特性方程式を満足し、またこの特性方程式の解 λ に対し、 $-\lambda^2$ は $L_{X,\alpha}$ の固有値である:

$$\det M(\lambda) = 0.$$

ここで $M(\lambda)$ は次で定義される実の対称行列である:

$$M(\lambda) = \left(\frac{2\lambda}{\alpha_j} \delta_{ij} + e^{-\lambda|x_i - x_j|} \right)_{i,j=1}^n.$$

第3章 主定理

最初に次の一般的な補題を証明しておかねばならない。記号 $\text{diag}(a_1, a_2, \dots, a_n)$ で、 a_1, a_2, \dots, a_n , を対角成分とする行列を表すことにする。

Proposition 1 *Let $k > 0$, $T(k) = (t_{ij}(k))_{i,j=1}^n$ be a real symmetric and continuously differentiable matrix and $T = \text{diag}(a_1, a_2, \dots, a_n)$. Suppose that $\lim_{k \rightarrow \infty} T(k) = T$. Then the followings hold: (i) There exist n continuously differentiable functions $\mu_i(k)$ that represent the repeated eigenvalues of $T(k)$; (ii) $\lim_{k \rightarrow \infty} \mu_i(k) = a_i$ for all i (with renumbering $\mu_i(k)$).*

Proof. [5] の Theorem 6.8 が (i) そのものである。(ii) を証明しよう。それには、これも [6, 5] の第 6 章第 5 節にある次の事実を証明なしで用いる。

Proposition 2 *Let A and A' be real symmetric matrices and ν_i and ν'_i are the eigenvalues of A and A' with $\nu_1 \leq \nu_2 \leq \dots \leq \nu_n$ and $\nu'_1 \leq \nu'_2 \leq \dots \leq \nu'_n$. Then it holds that $\max_i |\nu_i - \nu'_i| \leq \|A - A'\|$.*

$a_i \neq a_j$ ($i \neq j$) のときは、以下のようにして $\lim_{k \rightarrow \infty} \mu_i(k) = a_i$ が確かめられる。記述を簡単にするために添字をつけかえて

$$a_1 < a_2 < \dots < a_n$$

となるようにしておき、 ϵ を $0 < \epsilon < \min\{|a_i - a_j|\}$ となるように選んでおく。すると、ある $K > 0$ があって、 $k > K$ ならば $\|T(k) - T\| < \epsilon/3$ とできる。したがって、 $k > K$ とすると、Proposition 2 により、ただ 1 つの $T(k)$ の固有値が区間 $I_i = [a_i - \epsilon/3, a_i + \epsilon/3]$ にあり、この I_i の両外側である $(a_{i-1} + \epsilon/3, a_i - \epsilon/3)$ と $(a_i + \epsilon/3, a_{i+1} - \epsilon/3)$ にはひとつも固有値が含まれない。ただし、 $a_0 = -\infty$ 、 $a_{n+1} = \infty$ とする。さらに (i) からわかることで、すべての $\mu_i(k)$ は連続関数だから、適当に μ_i の添字をつけかえておけば、 $k > K$ では $\mu_i(k) \in I_i$ となるとしてよい。よって、 $k > K$ では

$$|\mu_i(k) - a_i| < \frac{\epsilon}{3}$$

となり、 ϵ はいくらでも小さくできるので、 $\lim_{k \rightarrow \infty} \mu_i(k) = a_i$ である。

強度がすべて異なるとは限らない場合もほぼ同様である。簡単のために $a_1 < a_2 = a_3 < a_4 \leq \dots \leq a_n$ となっている場合を調べてみる。他の場合も同様の証明ができる。まず、 ϵ を $0 < \epsilon < \min\{|a_i - a_j|; a_i \neq a_j\}$ となるように選ぶ。すると、仮定より、ある $K > 0$ があって、 $k > K$ ならば $\|T(k) - T\| < \epsilon/3$ となる。したがって、 $k > K$ とすると、Proposition 2 により、ちょうど2つの $T(k)$ の固有値が区間 $I_2 = [a_2 - \epsilon/3, a_2 + \epsilon/3]$ にあり、この I_2 の両外側である $(a_1 + \epsilon/3, a_2 - \epsilon/3)$ と $(a_2 + \epsilon/3, a_4 - \epsilon/3)$ にはひとつも固有値が含まれない。さらに $\mu_i(k)$ は連続だから、 $k > K$ の範囲ではちょうど2つの $\mu_i(k)$ だけが I_2 に値をとることになる。それらを $\mu_2(k)$ 、 $\mu_3(k)$ とすれば、

$$|\mu_2(k) - a_2| < \frac{\epsilon}{3}, \quad |\mu_3(k) - a_3| < \frac{\epsilon}{3}$$

を満たし、 ϵ はいくらでも小さくできるので、 $\lim_{k \rightarrow \infty} \mu_2(k) = a_2$ と $\lim_{k \rightarrow \infty} \mu_3(k) = a_3$ が成り立つ。他の $\mu_i(k)$ についても同様の議論ができる。□

この Proposition から、次の鍵となる Lemma が導かれる。

Lemma 1 *Suppose that there exists $\lambda_0 > 0$ such that $M(\lambda_0)$ is positive definite. Then $L_{X,\alpha}$ has at least m negative eigenvalues.*

Proof. $\lambda \rightarrow \infty$ の極限で、

$$\frac{1}{2\lambda} M(\lambda) \rightarrow \text{diag}(1/\alpha_1, 1/\alpha_2, \dots, 1/\alpha_n)$$

となるので、Proposition 1 によって、 n 個の連続関数 $\mu_i(\lambda)$ があって、それらは $M(\lambda)$ の固有値であり、さらに

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \frac{\mu_i(\lambda)}{2\lambda} = \frac{1}{\alpha_i}$$

を満足するものが存在する。したがって、 α_i が負の場合には、 λ が十分おおきいときには $\mu_i(\lambda)$ も負の値をとる。一方、仮定から $\mu_i(\lambda_0)$ は正であり、 $\mu_i(\lambda)$ は連続関数なので、必ずある正の λ_i で $\mu_i(\lambda_i) = 0$ となり、 $\det M(\lambda_i) = 0$ となる。これは、つまり $-\lambda_i^2$ が $L_{X,\alpha}$ の固有値となることを意味している。

このようにして負の α_i について定まるすべての λ_i が互いに異なることを確かめよう。もし異なる i と j で、 $\lambda_i = \lambda_j$ となったとすると、 $M(\lambda_i)$ は重複する固有値を持ち、その2つの一次独立な固有値ベクトルに対応した $L_{X,\alpha}$ の一次独立な固有関数が2つ存在することになる (Chapter II.2.1 in [3]) ので、すでに知られている事実、 $L_{X,\alpha}$ の固有値が単純であることに矛盾する。

以上より、 $L_{X,\alpha}$ は少なくとも m 個の固有値を持つことになる。□

この Lemma 1 と、つぎの Gerschgorin による定理を用いることで、我々の主定理である Theorem 2 を証明することができる。この主定理は、負の強度の絶対値の最小値

$$A = \min\{|\alpha_j|; \alpha_j < 0\}$$

と作用点間の距離の最小値

$$D = \min\{|x_i - x_j|; i \neq j\}$$

の積 AD が十分に大きければ、 $L_{X,\alpha}$ は少なくとも m 個の固有値を持つことを示している。

Theorem 1 (Gerschgorin, Theorem 4.5.1 in [4], Theorem 1.1 in [7]) *All eigenvalues of a matrix $T = (t_{ij})_{i,j=1}^n$ are contained in the union of Gerschgorin's disks*

$$G_i = \left\{ z \in \mathbb{C}; |z - t_{ii}| \leq \sum_{j \neq i} |t_{ij}| \right\} \quad \text{for } i = 1, 2, \dots, n.$$

次が今回の主定理である。

Theorem 2 (i) *If there exists $\lambda_0 > 0$ such that*

$$\frac{2\lambda_0}{\alpha_i} + 1 - \sum_{j \neq i} e^{-\lambda_0 |x_j - x_i|} > 0 \quad \text{for } i = 1, 2, \dots, n,$$

then $L_{X,\alpha}$ has at least m negative eigenvalues.

(ii) *If $AD > 2$ and $e^{AD/2-1}/AD > (n-1)/2$, then $L_{X,\alpha}$ has at least m negative eigenvalues.*

Proof. $m = 0$ のときは自明なので、 $m > 0$ を仮定する。また Lemma 1 の証明と同じ記号を用いることとする。

まず (i) を証明する。記述を簡単にするために $\delta_i(\lambda) = \sum_{j \neq i} e^{-\lambda |x_j - x_i|}$ とおいて、

$$G_i(\lambda) = \left[\frac{2\lambda}{\alpha_i} + 1 - \delta_i(\lambda), \frac{2\lambda}{\alpha_i} + 1 + \delta_i(\lambda) \right]$$

とおく。これは $M(\lambda)$ の Gerschgorin 円盤と実軸の共通部分からなる閉区間である。 $M(\lambda)$ が実対称行列なので実の固有値しか持たないことと Theorem 1 によって、すべての i について $\mu_i(\lambda) \in \bigcup_{j=1}^n G_j(\lambda)$ となる。したがって、仮定は $G_i(\lambda_0)$ の最小値が正であることから、すべての固有値 $\mu_i(\lambda_0)$ が正の値をとり、 $\det M(\lambda_0)$ は正定

値行列となる。よって、Lemma 1 から $L_{X,\alpha}$ は少なくとも m 個の固有値をもつとわかる。

(ii) は (i) の系として証明できる。 $\eta(\lambda) = (n-1)e^{-\lambda D}$ とおくと、 $\delta_i(\lambda) \geq \eta(\lambda)$ だから、

$$\min G_i(\lambda) \geq -\frac{2\lambda}{A} + 1 - \eta(\lambda)$$

となる。もし

$$-\frac{2\lambda_0}{A} + 1 - \eta(\lambda_0) > 0 \quad (3.1)$$

であれば、(i) の仮定をみたすことがわかる。そして、以下に見るように、このような λ_0 の存在と (ii) の仮定は同値であるから (ii) が成り立つ。

λ_0 の存在と (ii) の仮定の同値性を確かめておこう。関数 $f(\lambda) = -2\lambda/A + 1$ は傾きが負の直線で $f(0) = 1$ 、関数 $\eta(\lambda)$ は下に凸な単調減少関数で $\eta(0) = n-1 > 1$ なので、

$$f'(\lambda_0) = \eta'(\lambda_0) \quad (3.2)$$

となる $\lambda_0 > 0$ に対して $f(\lambda_0) > \eta(\lambda_0)$ となる条件が、式 (4.1) が成立する必要十分条件である。まず λ_0 を求める。式 (3.2) より、 $-2/A = -(n-1)De^{-\lambda_0 D} \Leftrightarrow e^{\lambda_0 D} = (n-1)AD/2$ なので

$$\lambda_0 = \frac{1}{D} \log \left(\frac{(n-1)AD}{2} \right).$$

$\lambda_0 > 0$ でなくてはならないから、

$$AD > \frac{2}{n-1}. \quad (3.3)$$

λ_0 を $f(\lambda_0) > \eta(\lambda_0)$ に代入すると

$$-\frac{2}{AD} \log \left(\frac{(n-1)AD}{2} \right) + 1 > \frac{2}{AD}$$

だから

$$\frac{e^{AD/2-1}}{AD} > \frac{n-1}{2}. \quad (3.4)$$

を得る。よって、式 (4.1) が成立する必要十分条件は、式 (3.3) と式 (3.4) が同時に成立することである。式 (3.3) と式 (3.4) の両辺をかけることで $e^{AD/2-1} > 1$ を得られるので、

$$AD > 2 \quad (3.5)$$

でなくてはならない。したがって、式 (4.1) が成立する必要十分条件は、式 (3.5) と式 (3.4) が同時に成立することであり、これは (ii) の仮定である。□

いくつか計算例をあげておく。

Example. $n = 2$ で、 α_1 と α_2 がともに負の値のときは、Lemma 1 の仮定:

$$(2\lambda_0/\alpha_1 + 1)(2\lambda_0/\alpha_2 + 1) > e^{-2\lambda_0|x_2-x_1|}$$

なる $\lambda_0 > 0$ の存在は、 $|x_2 - x_1| > |\alpha_1|^{-1} + |\alpha_2|^{-1}$ という条件に同値である。なぜなら、2 次関数 $f(\lambda) = (2\lambda/\alpha_1 + 1)(2\lambda/\alpha_2 + 1)$ は下に凸で放物線の軸は正の範囲にあり、 $\lambda = 0$ では 1 だから、指数関数 $g(\lambda) = e^{-2\lambda|x_2-x_1|}$ と $\lambda = 0$ で共有点をもつので、 $\lambda = 0$ で接線の傾きが

$$f'(0) = 2(1/\alpha_1 + 1/\alpha_2) > g'(0) = -2|x_2 - x_1|$$

をみたせばよいが、これが求める条件である。したがって、この条件を満たし、 α_1 と α_2 がともに負の値のときは $N = 2$ となる。これは [2] の Example 1 の一部である。

Example. 次に $n = 3$ で $m = 2$ のときを見てみる。数値例をあげよう。 $\alpha_1 = -6$, $\alpha_2 = 1$, $\alpha_3 = -4$, $x_1 = -2$, $x_2 = 0$, $x_3 = 2$ とする。このとき、 $A = 4$, $D = 2$ だから、 $AD = 8 > 2$, $e^{8/2-1}/8 = e^3/8 \sim 2.5 > (3-1)/2 = 1$ なので、Theorem 2 (ii) の仮定を満たして、 N は 2 以上である。

実際は $N = 2$ である; $N \leq 3$ なので、 $\det M(\lambda)$ の零点は高々 3 つであり、 $\det M(0) = 0$, $\det M(1) \sim 0.98$, $\det M(2.5) \sim -0.25$ と $\det M(\lambda)$ が $\lambda \rightarrow \infty$ で正の無限大に発散することから、 $\det M(\lambda)$ は $\lambda > 0$ の範囲にちょうど 2 つの零点をもつからである。

もちろん、Albeverio と Nizhnik のアルゴリズムを使っても同等の結果を得ることができるが、それはこのような小さな n でなければ計算がかなり大変である。しかし、我々の Theorem 2 をつかえば、どんなに大きな n のときでも、容易に N の下限をみつめることができる。

第4章 Discussion

この最後の章では前の章で得た主定理の改良を試みたい。 $M(\lambda)$ の固有値の存在範囲について、Gerschgorin の定理よりも良い評価が得られるのであれば、我々の主定理も改良される余地がある。実際、それは不十分ながらも可能である。

Proposition 3 *Suppose that $1/\alpha_1 < 1/\alpha_2 \leq 1/\alpha_i$ for all $i \geq 3$ (with renumbering α_i) and that there exists $\lambda > 0$ such that*

$$\left(\frac{2\lambda}{\alpha_1} + 1\right) \left(\frac{2\lambda}{\alpha_2} + 1\right) > (n-1)^2 e^{-2\lambda D}. \quad (4.1)$$

In addition, if $m \geq 2$, suppose that $\lambda < -\alpha_2/2$. Then $L_{X,\alpha}$ has at least m negative eigenvalues.

Proof. この Proposition の仮定のもとでは、Gerschgorin の定理の代わりに Brauer-Cassini の定理 (Theorem 2.2 in [7]) が利用できる。この定理から、すべての固有値 $\mu_i(k)$ が $\cup_{j \neq k} K_{j,k}$ に含まれることがわかる。ここで、集合 $K_{j,k}$ は $M(\lambda)$ の Brauer-Cassini の楕円である：行列 $T = (t_{ij})_{i,j=1}^n$ の $K_{j,k}$ は

$$K_{j,k} = \left\{ z \in \mathbf{C}; |z - t_{jj}| \cdot |z - t_{kk}| \leq \sum_{i \neq j} |t_{ij}| \cdot \sum_{i \neq k} |t_{ik}| \right\}$$

で定義される。

$a_1 = 2\lambda/\alpha_1 + 1$, $a_2 = 2\lambda/\alpha_2 + 1$, $\eta = (n-1)e^{-\lambda D}$ とおくと、多少の計算で次の評価ができる：

$$\min \cup_{j \neq k} K_{j,k} \cap \mathbf{R} \geq \frac{1}{2} \left[(a_1 + a_2) - \sqrt{(a_1 - a_2)^2 + 4\eta^2} \right]. \quad (4.2)$$

この Proposition の仮定のもとでは $a_1 > 0$, $a_2 > 0$ なので、仮定 (4.1) であれば、式 (4.2) の右辺も正となることは容易にわかる。もし式 (4.2) の右辺がある λ で正になれば、固有値の全てが正なので、 $M(\lambda)$ は正定値となり、Lemma 1 から $L_{X,\alpha}$ が少なくとも m 個の固有値をもつとわかる。□

$\text{RHS} > a_1 - \eta = -2\lambda/A - \eta$ だから、この Proposition は Theorem 2 よりも強い主張をしている。例をあげよう。

Example. $\alpha_1 = -6, \alpha_2 = 1, \alpha_3 = -4, x_1 = -5/4, x_2 = 0, x_3 = 5/4$ としよう。このとき、 $\lambda = 1$ ととると、Proposition 3 の仮定をみたすことがわかる。実際、

$$\left(\frac{2}{-6} + 1\right) \left(\frac{2}{-4} + 1\right) = \frac{1}{3} > (3-1)^2 e^{-5/2} \sim 0.328$$

であり、また $\lambda = 1 < -\alpha_2/2 = 2$ なので、 $N \leq 2$ がわかる。

一方、 $AD = 5 > 2$ だが $e^{5/2-1}/5 \sim 0.9 < (3-1)/2 = 1$ となるので、Theorem 2 (ii) から $N \leq 2$ は結論できない。

しかしながら、 $\alpha_1 = \alpha_2$ の場合、 $\text{RHS} = -2\lambda/A - \eta$ なので、Proposition 3 の証明は、まったく Theorem 2 を改善することができない。今回の我々の方針でさらなる改良をするためには、 $M(\lambda)$ をもっとくわしく調べる必要がある。

関連図書

- [1] S. Albeverio and L. Nizhnik. Schrödinger operators with a number of negative eigenvalues equal to the number of point interactions. *Methods Funct. Anal. Topology*, 9(4):273–286, 2003.
- [2] S. Albeverio and L. Nizhnik. On the number of negative eigenvalues of a one-dimensional Schrödinger operator with point interactions. *Lett. Math. Phys.*, 65:27–35, 2003.
- [3] S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Hoegh-Krohn, and H. Holden. *Solvable Models in Quantum Mechanics*. Springer-Verlag, 1988.
- [4] F. Chatelin. *Valeurs propres de matrices*. Masson, Paris, 1988.
- [5] Tosio Kato. *Perturbation Theory for Linear Operators*. Springer, 1966.
- [6] Tosio Kato. *Short Introduction to Perturbation Theory for Linear Operators*. Springer, 1982.
- [7] Richard. S. Varga. *Geršgorin and His Circles*. Springer Series in Computational Mathematics. Springer, Berlin, 2004.

d -正則木のグリーン関数についてのノート

小栗栖 修 (金沢大学)

1 Introduction

グリーン関数は関数解析の基本的な道具であり、その応用は計り知れないものがあるが、無限グラフの離散ラプラシアンについてはその関数形が知られているものはほとんどない。もちろん、グリーン関数そのものの存在は容易にわかるし、積分表示などがよく知られているものはある。たとえば無限離散グラフの雛型である正方格子グラフ \mathbb{Z}^d のグリーン関数は、フーリエ変換を通して

$$g(x, y; z) = \frac{-1}{(2\pi)^d} \int_0^{2\pi} \cdots \int_0^{2\pi} \frac{e^{\sqrt{-1}(x-y) \cdot \theta}}{(\cos \theta_1 + \cdots + \cos \theta_d)/2^{d-1} + z} d\theta_1 \cdots d\theta_d$$

という重積分の形で容易に得られる。しかし、この積分は Watson 積分と呼ばれるもののひとつで、初等関数の合成などによる簡明な関数形は知られていない。1次元の正方格子 \mathbb{Z} の場合は、

$$g(x, y; z) = \frac{(z + R_2^{1/2}(z))^{|m-n|}}{R_2^{1/2}(z)}$$

$$R_2^{1/2}(z) = -\sqrt{z-1}\sqrt{z+1}$$

という形が知られている [3]。筆者が主任指導教員であった金沢大学自然科学研究科博士前期課程の松本智徳による研究 [1] で次の簡潔な関数形を得ている。

$$g(x, y; z) = \frac{\sqrt{-1}e^{-\sqrt{i}p|x-y|}}{\sin p}$$

ここで

$$p = \arccos(-z-1)$$

である。このノートでは、 d -正則木、すなわち次数が d で一定の無限木のグリーン関数を求めてみた。

なお、 \mathbb{Z}^+ で原点にディリクレ条件を課したラプラシアングリーン関数は、安藤 [2] が計算している。これはいわゆるヤコビ行列の特別な場合なので、そちらへの応用が期待できる。

2 $(-\Delta - z)g(x) = \delta(x)$ の $l^2(T_d)$ 解を作る。

表題の解 g が得られれば、そこからグリーン関数は構成できる。その準備を行なう。 $P = \Delta + 1$ を遷移確率行列とする。

Proposition 1. T_d の頂点の一つを固定して、0 と書く。 $a = a(x)$ を、0 と頂点 x との距離とする。

$$h(x) = \frac{e^{ipa(x)}}{\sqrt{d-1}^{a(x)}}$$

とおくと、 $h(0) = 1$, $Ph(0) = \frac{e^{ip}}{\sqrt{d-1}}$, $Ph(x) = \frac{2\sqrt{d-1} \cos p}{d} h(x)$ ($x \neq 0$).

Proof. $x = 0$ のとき: 0 に隣接する頂点 v_1, \dots, v_d に対し、 $a(v_j) = 1$ だから

$$h(v_1) = \dots = h(v_d) = \frac{e^{ip}}{\sqrt{d-1}}.$$

よって

$$Ph(0) = \frac{(h(v_1) + \dots + h(v_d))}{d} = \frac{e^{ip}}{\sqrt{d-1}}.$$

$x \neq 0$ のとき: x に隣接する d 個の頂点 v_1, \dots, v_d に対して、 $a(v_1) = a(x) - 1$, $a(v_2) = \dots = a(v_d) = a(x) + 1$ としてよい。簡単のため $a = a(x)$ とおく。

$$\begin{aligned} Ph(x) &= \frac{(h(v_1) + \dots + h(v_d))}{d} \\ &= \frac{1}{d} \left\{ \frac{e^{ip(a-1)}}{\sqrt{d-1}^{a-1}} + \frac{e^{ip(a+1)}}{\sqrt{d-1}^{a+1}} + \dots + \frac{e^{ip(a+1)}}{\sqrt{d-1}^{a+1}} \right\} \\ &= \frac{1}{d} \frac{e^{ipa}}{\sqrt{d-1}^{a-1}} \left\{ e^{-ip} + \frac{e^{ip}}{\sqrt{d-1}^2} + \dots + \frac{e^{ip}}{\sqrt{d-1}^2} \right\} \\ &= \frac{1}{d} \frac{e^{ipa}}{\sqrt{d-1}^{a-1}} \{ e^{-ip} + e^{ip} \} \\ &= \frac{2\sqrt{d-1} \cos p}{d} h(x) \end{aligned}$$

□

次に Proposition 1 の h を用いて、 $(-\Delta - z)g(x) = \delta(x)$ の $l^2(T_d)$ 解が作れることを見よう。

Proposition 2. $\Im p > 0$ と制限し、

$$g(x) = \frac{h(x)}{c} \text{ with } c = \frac{1}{d} \left(\frac{\sqrt{d-1}}{e^{ip}} - \frac{e^{ip}}{\sqrt{d-1}} \right)$$

とおくと、 $c \neq 0$ のときに限るが、 $g \in l^2(T_d)$ であり、方程式

$$(-\Delta - z)g(x) = \delta(x) \text{ with } z = -\frac{2\sqrt{d-1}\cos p}{d} + 1$$

を満たす。

Proof. まず $g \in l^2(T_d)$ であることを示す。

$$\begin{aligned} \sum_{x:a(x) \leq n} |g(x)|^2 &= \sum_{j=0}^n \sum_{x:a(x)=j} |g(x)|^2 \\ &= \sum_{j=0}^n \sum_{x:a(x)=j} \left| \frac{e^{ipj}}{\sqrt{d-1}^j} \right|^2 \\ &= \sum_{j=0}^n \sum_{x:a(x)=j} \frac{|e^{2ipj}|}{(d-1)^j} \\ &= \sum_{j=0}^n 2^j \frac{|e^{2ipj}|}{(d-1)^j} \\ &= \sum_{j=0}^n \left(\frac{2}{d-1} e^{-2\Im p} \right)^j \end{aligned}$$

なので、 $n \rightarrow \infty$ で収束する。

$x \neq 0$ のとき:

$$(-\Delta - z)h(x) = -\frac{2\sqrt{d-1}\cos p}{d}h(x) + h(x) - \left(-\frac{2\sqrt{d-1}\cos p}{d} + 1\right)h(x) = 0.$$

よって

$$(-\Delta - z)g(x) = \frac{0}{c} = 0.$$

$x = 0$ のとき:

$$\begin{aligned} (-\Delta - z)h(0) &= -\frac{e^{ip}}{\sqrt{d-1}} + h(0) - \left(-\frac{2\sqrt{d-1}\cos p}{d} + 1\right)h(0) \\ &= \left(\frac{\sqrt{d-1}}{d} - \frac{1}{\sqrt{d-1}}\right)e^{ip} + \left(\frac{\sqrt{d-1}}{d}\right)e^{-ip} \\ &= \left(-\frac{1}{d\sqrt{d-1}}\right)e^{ip} + \left(\frac{\sqrt{d-1}}{d}\right)e^{-ip} \\ &= \frac{1}{d} \left(\frac{\sqrt{d-1}}{e^{ip}} - \frac{e^{ip}}{\sqrt{d-1}}\right) \\ &= c. \end{aligned}$$

よって

$$(-\Delta - z)g(0) = \frac{c}{c} = 1.$$

□

3 グリーン関数の構成

$G(z; x, y)$ が $-\Delta$ のグリーン関数であるとは、 $z \in \rho(-\Delta)$ に対して

$$(-\Delta - z)G = G(-\Delta - z) = I \text{ on } l^2(T_d)$$

をみたすことである。ここで G は $\phi \in l^2(T_d)$ に対して次で定義する。

$$G\phi(x) = \sum_{y \in T_d} G(z; x, y)\phi(y).$$

次の Lemma は、前節 2 の関数 g を使って $-\Delta$ のグリーン関数が構成できることを示している。

Lemma 1. $z = -\frac{2\sqrt{d-1}\cos p}{d} + 1$ とする。前節 2 の g を、木の根 0 を x として

$$G(z; x, y) = g(y)$$

と定義すると、この G は Δ のグリーン関数である。

Proof. 実際に $\phi \in l^2(T_d)$ に対して $(-\Delta - z)G\phi = \phi$ と $G(-\Delta - z)\phi = \phi$ を確かめる。 $g \in l^2(T_d)$ なので、以下の式の和の順序交換は可能である。

$$\begin{aligned} (-\Delta - z)G\phi(x) &= -\frac{1}{d} \sum_{y \sim x} G\phi(y) + (1 - z)G\phi(x) \\ &= -\frac{1}{d} \sum_{u \sim x} \sum_{y \in T_d} G(z; u, y)\phi(y) + (1 - z) \sum_{y \in T_d} G(z; x, y)\phi(y) \\ &= -\frac{1}{d} \sum_{y \in T_d} \sum_{u \sim x} G(z; u, y)\phi(y) + (1 - z) \sum_{y \in T_d} G(z; x, y)\phi(y) \\ &= \sum_{y \in T_d} \left(-\frac{1}{d} \sum_{u \sim x} G(z; u, y) + (1 - z)G(z; x, y) \right) \phi(y) \\ &= \sum_{y \in T_d} \delta_{x,y} \phi(y) \\ &= \phi(x). \end{aligned}$$

残りの $G(-\Delta - z)\phi = \phi$ も同様に確認できる。

$$\begin{aligned}
G(-\Delta - z)\phi(x) &= \sum_{y \in T_d} G(z; x, y)(-\Delta - z)\phi(y) \\
&= \sum_{y \in T_d} G(z; x, y) \left(-\sum_{u \sim y} \phi(u) + \phi(y) - z\phi(y) \right) \\
&= -\sum_{y \in T_d} G(z; x, y) \sum_{u \sim y} \phi(u) + (1 - z) \sum_{y \in T_d} G(z; x, y)\phi(y) \\
&= -\frac{1}{d} \sum_{y \in T_d} \sum_{u \sim y} G(z; x, u)\phi(y) + (1 - z) \sum_{y \in T_d} G(z; x, y)\phi(y) \\
&= \sum_{y \in T_d} \left(-\frac{1}{d} \sum_{u \sim y} G(z; x, u) + (1 - z)G(z; x, y) \right) \phi(y) \\
&= \sum_{y \in T_d} \delta_{x,y} \phi(y) \\
&= \phi(x).
\end{aligned}$$

□

参考文献

- [1] 松本智徳, 「有限個のポテンシャルを伴う離散ラプラシアン固有値」, 金沢大学自然科学研究科博士前期課程修士論文, (2006).
- [2] 安藤, Private communication, 5 May 2008, 愛媛大学にて.
- [3] Gerald Teschl. *Jacobi Operators and Complete Integrable Nonlinear lattices*, volume 72 of *Mathematical Surveys and Monographs*. AMS, 1999.

細分グラフの固有値の挙動と
元のグラフの次数の分布について

小栗栖 修（金沢大学）

第1章 Introduction

1.1 背景と得られた結果の概要

グラフに対応する行列の固有値全体をグラフのスペクトルという. 一般にスペクトルはグラフを一意的に特徴付けるものではないが, グラフの多くの性質を反映しており, それらの関係について詳しく調べられている.

この報告では, 与えられたグラフ G に対して n -細分グラフ $S^n(G)$ を考えて, n を大きくしたときの $S^n(G)$ の隣接行列のスペクトル $\sigma(S^n(G))$ の挙動から元のグラフ G についての情報を得ることを試みた. その結果, $\sigma(S^n(G))$ の極限の集中する点の配置とグラフ G の 3 次以上の頂点の分布に関する定理を得られた. すなわち, G において次数 $k \geq 3$ の等しい頂点 v_1, v_2, \dots, v_m を中心とする木からなる n 細分グラフ G_n の部分グラフ F_n の隣接行列 A_{F_n} の最大固有値を λ_n とする. そのとき G_n のスペクトル $\sigma(G_n)$ で λ_n に漸近する固有値があり, どんな k に対しても

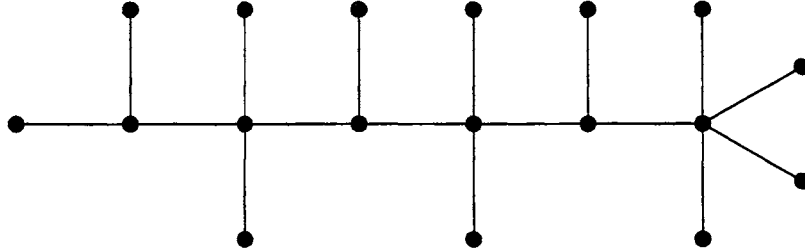
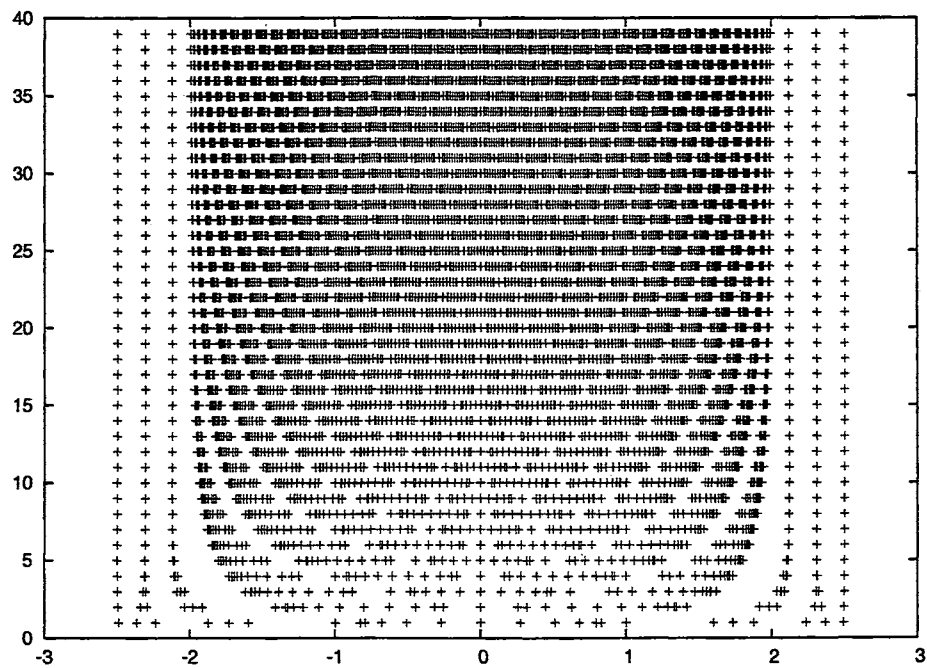
$$|\lambda_n - \lambda| < \frac{m}{\sqrt{\lceil \frac{n}{3} \rceil}}$$

をみたす G_n の固有値 λ は重複を含めて m 個以上あることを示した.

1.2 数値計算例

この報告は, 数値計算で挙動を観察し得られた予想を厳密に証明した定理が主題である. 参考までに, 数値計算の結果を紹介しておく.

まずグラフ G を n 細分したグラフ G_n の固有値 λ の値を計算した. 例として図 1.1 のグラフ G の n 細分グラフ G_n について得られた固有値 λ と細分数 n の関係をグラフに描いたものが図 1.2 である.

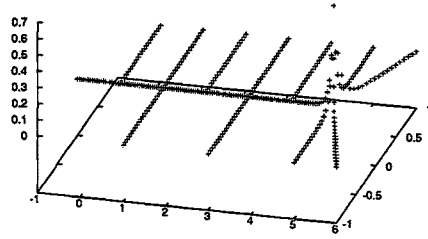
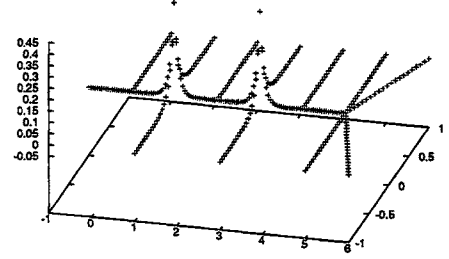
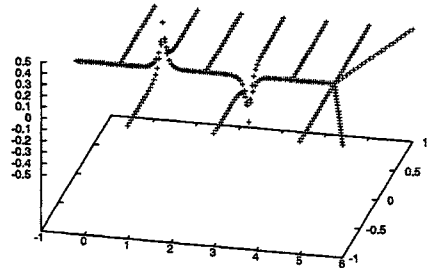
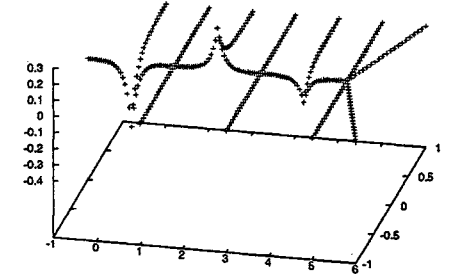
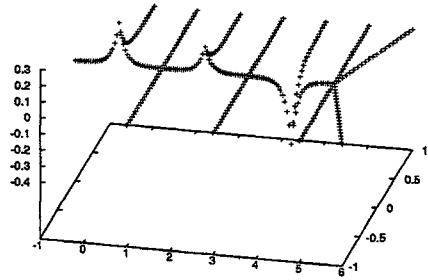
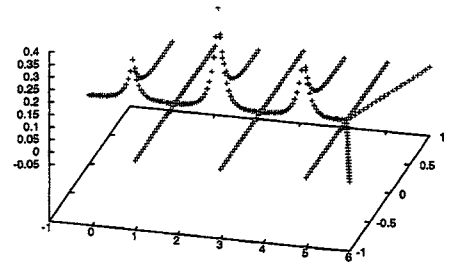
図 1.1: グラフ G 図 1.2: グラフ G (図 1) の n 細分グラフ G_n の固有値 λ (横軸) と細分数 n (縦軸) の関係

多数の計算例で以下の傾向が見られた.

1. 細分数 n の値が大きくないとき, 範囲 $(2, \infty)$ に分岐点の数に等しい数の固有値があらわれる.
2. 細分数 n の値が大きくなると, 次数の等しい分岐点ごとに定まるいくつかの値に固有値が集中しているように思われる.
3. 固有値の集中する点の値は分岐点の次数が大きい程大きくなる.

さらに, n 細分グラフの固有値 λ ごとにその固有ベクトルと細分数 n の関係についての計算例が図 1.3 である.

図 1.1 のグラフ G は 5 次の頂点が 1 つなので対応する固有値は λ_1 の 1 つ, 4 次の頂点は 2 つなので対応する固有値は λ'_1, λ'_2 の 2 つ, 3 次の頂点は 3 つなので対応する固有値は $\lambda''_1, \lambda''_2, \lambda''_3$ の 3 つがあらわれる. 固有ベクトルの成分は次数の等しい頂点のまわりでのみ大きい値をとり, 次数の異なる頂点どうしは互いに干渉していないと思われた. つまり, 固有ベクトルの成分の分布が固有値に対応する次数の頂点に集中している様子がみられた. そこから次数の等しい頂点ごとにその固有値と頂点数の関係を数学的に調べる着想を得て, 主定理 3.2 を証明できた. なお数値計算は木グラフに対して行ったが, 主定理 3.2 は一般のグラフで成り立つ.

最大固有値 λ_1 最大固有値 λ'_1 第2固有値 λ'_2 最大固有値 λ''_1 第2固有値 λ''_2 第3固有値 λ''_3

固有値の大小関係は, $\lambda_1 > \lambda'_1 > \lambda'_2 > \lambda''_1 > \lambda''_2 > \lambda''_3$

λ_1 : 次数5の分岐点に対する固有値

λ'_1, λ'_2 : 次数4の分岐点に対する固有値

$\lambda''_1, \lambda''_2, \lambda''_3$: 次数3の分岐点に対する固有値

図 1.3: 図 1.1 のグラフ G の細分グラフ G_{20} の固有ベクトル

第2章 問題設定

2.1 一般的な用語と記号の準備

グラフ G とは, p 個の頂点集合 $V(G) = \{v_1, v_2, \dots, v_p\}$ と G の 2 つの頂点 v_i と v_j を結ぶ q 個の辺、すなわち順序を問わない対 $e = v_i v_j = v_j v_i$ の集合 $E(G) = \{e_1, e_2, \dots, e_q\}$ の対 $G = (V(G), E(G))$ のことを言う. p も q も有限であるグラフを有限グラフといい, その他の場合を無限グラフという. この報告では, G は無向単純な有限グラフとする. グラフの頂点 v に接続している辺の個数をその頂点 v の次数といい, $\deg(v)$ とかく.

グラフ $G = (V(G), E(G))$ の隣接行列 $A_G = (a_{i,j})_{i,j=1,2,\dots,p}$ は

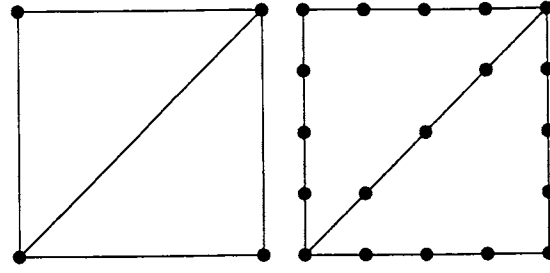
$$a_{ij} = \begin{cases} 1 & ; v_i v_j \in E(G) \\ 0 & ; v_i v_j \notin E(G) \end{cases}$$

で定義される p -次正方行列である. この A_G の固有値をグラフ G の固有値といい, 固有値全体の集合を $\sigma(A_G)$ と書くことにする. この報告では, G は無向で単純な有限グラフを考えるので, A_G は対称行列となり, 固有値はすべて実数となる. また, 固有値は頂点の番号付けによらない.

グラフ G を n 細分するとは, G の全ての辺に新しい頂点をちょうど n 個増やすことをいう. n -細分されたグラフを $S^n(G) = G_n$ とかく (図 2.1). また, G を G_0 ともかくことにする.

2.2 この報告で導入された用語と細分グラフの分割

また, この報告では, 次数が 3 以上の頂点が重要な役割を持つので, とくに分岐点とよぶことにし, ボールド体の記号 \mathbf{b} をつかって分岐点を表すことにする. ま

図 2.1: グラフ G と G の3細分グラフ G_3

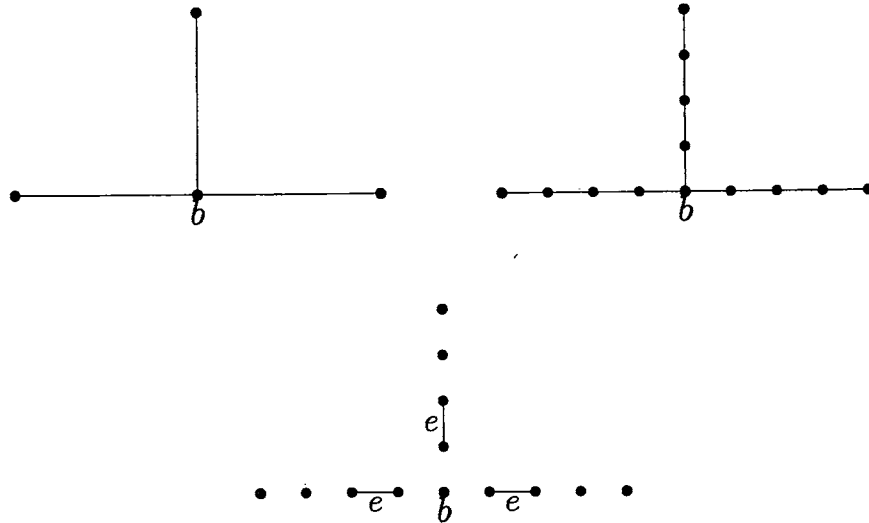
た G の分岐点の個数を M と書く. さらに辺 $e = v_1v_2$ と頂点 v の距離 $d(e, v)$ を、

$$d(e, v) = \min\{d(v_1, v), d(v_2, v)\}$$

と定める. ここで頂点間の距離は通常どおり最短の路の長さで定めておく. 細分グラフ G_n の辺 e が**接続辺**であるとは、ある分岐点 b があって、

$$d(e, b) = \left\lceil \frac{n}{3} \right\rceil$$

をみたすことをいう (図 2.2). ここで $\lceil x \rceil$ は、 x を超えない最大の整数である.

図 2.2: 左上より, G_0 , G_0 の3細分グラフ G_3 , G_3 の接続辺 e

主定理を示すためには、 G_n を次数の等しい頂点ごとに部分グラフに分割して考える必要があるので、その準備をする. まず G_n の部分グラフ $F_n = (V(F_n), E(F_n))$

を

$$V(F_n) = V(G_n),$$

$$E(F_n) = \left\{ e \in E(G) \mid d(e, b) \leq \left\lceil \frac{n}{3} \right\rceil \text{をみたす} b \text{がある} \right\}$$

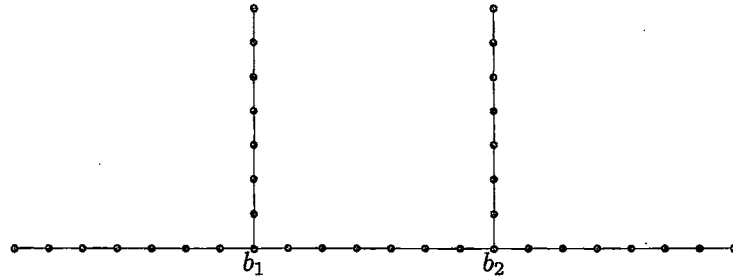
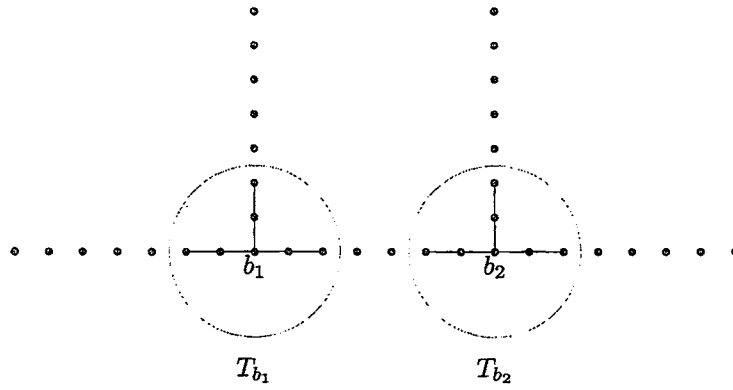
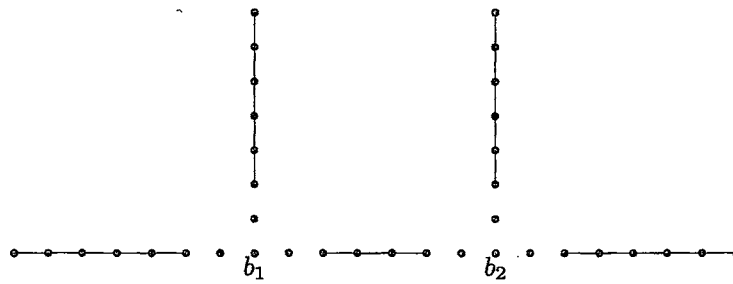
で定義する (図 2.4). また, 部分グラフ $H_n = (V(H_n), E(H_n))$ を

$$V(H_n) = V(G_n)$$

$$E(H_n) = E(G_n) \setminus E(F_n)$$

と定義する (図 2.5). つまり F_n は, 分岐点から距離 $\lceil n/3 \rceil$ 以下の辺だけを残した G_n の部分グラフであり, H_n は G_n からそれらの辺を除去した部分グラフである. 分岐点 b_i から距離 $\lceil n/3 \rceil$ 以下の辺だけでできる木を T_{b_i} とかく. G_n と F_n と H_n の隣接行列 A_{G_n} と A_{F_n} と A_{H_n} には次の関係が成り立っていることとに注意しておく:

$$A_{G_n} = A_{F_n} + A_{H_n}. \quad (2.1)$$

図 2.3: グラフ G_6 図 2.4: グラフ G_6 の部分グラフ F_6 図 2.5: グラフ G_6 の部分グラフ H_6

第3章 主定理

これ以降, 次数 k の分岐点を m 個もつグラフ G のみを考える。

3.1 隣接行列の表現

G_n は次のように分割される：

$$G_n = T_1 \cup T_2 \cup \cdots \cup T_m \cup F \cup H_n.$$

ここで, T_i は次数 k の分岐点をもつ F_n の部分木で, F は G_n から $T_1 \cup T_2 \cup \cdots \cup T_m \cup H_n$ を取り除いた部分グラフ, すなわち次数 k 以外の分岐点をもつ F_n の部分木からなる森とする。また,

$$S = \#V(G_n), \quad s = \#V(T_1) = \#V(T_2) = \cdots = \#V(T_m)$$

とかく, この s は n の 1 次式となる:

$$s = k \times \left\lceil \frac{n}{3} \right\rceil + 1. \quad (3.1)$$

このとき, A_{G_n} は

$$A_{G_n} = A_{F_n} + A_{H_n} = \begin{pmatrix} A_{T_1} & & & 0 \\ & A_{T_2} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & A_{T_m} \\ & & & & A_F \end{pmatrix} + A_{H_n}$$

と表せる。 A_{F_n} は, 部分木 T_i の隣接行列 A_{T_i} と森 F の隣接行列 A_F を, 対角ブロックに並べたものとなる。各 T_i は同じ型の木なので, その最大固有値は全て一致している。その値を μ とかく。

3.2 行列の固有値の近似

$m \leq n$ とする。 A と C をそれぞれ n 次と m 次のエルミート行列, Q を $n \times m$ -行列とすると、 A の C と Q に関する行列剰余を

$$R(C) = AQ - QC$$

で定義する。 また、行列 T のノルム $\|T\|_2$ を

$$\|T\|_2 = \max_{\substack{\|x\|_2=1 \\ x \in \mathbb{C}^n}} \|Tx\|_2 \quad (3.2)$$

で定義する。 ここで $\|x\|_2$ は通常の \mathbb{C}^n のノルム

$$\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n |x_i|^2}. \quad (3.3)$$

である。

次の定理 3.1 では、 n 次エルミート行列 A の m 個の固有値を m 次のエルミート行列 C のスペクトルで近似することを考える。

定理 3.1 [[3],p157] Q を m 個の正規直交ベクトルを並べて作る n -次正方行列とし、また C の固有値を $\{\alpha_i\}_{i=1}^m$ とかくと、 A の m 個の固有値 $\{\mu_i\}_{i=1}^m$ の集合で次をみたすものが存在する。

$$\max_i |\mu_i - \alpha_i| \leq \|R(C)\|_2.$$

3.3 主定理

本論文では、グラフ G_n の隣接行列 A_{G_n} の m 個の固有値を、 m 次単位行列の μ 倍である

$$C = \mu I_m \quad (3.4)$$

のスペクトルで近似することを考える。 ここで μ は A_{T_i} の最大固有値である。 また、ベクトル

$$\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_s)^t \in \mathbb{C}^s$$

を A_{T_i} の最大固有値 μ に属する正規な固有ベクトルとする。フロベニウスの定理により、最大固有値の固有ベクトルの成分は全て非負の実数にとれることを注意しておく。 T_i はすべて同型なので、適切な表現を得らんで、 \mathbf{x} は共通のベクトルにできる。この \mathbf{x} から $\tilde{x}_i \in \mathbb{C}^S$ を

$$\tilde{x}_i = (0, \dots, 0, x_1, x_2, \dots, x_s, 0, \dots, 0)^t$$

とする。ただし、 x_1 は第 $s(i-1)$ 番目の成分である。

$$A\tilde{x}_i = \mu\tilde{x}_i$$

となる。この \tilde{x}_i を並べて

$$Q = (\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \dots, \tilde{x}_m) \quad (3.5)$$

とおく。また、 $\|\tilde{x}_j\|_2 = \|x_j\|_2 = 1$ であり、

$$x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_s^2 = 1$$

である。

命題 3.1 A_{G_n} の行列剰余は、 $R(C) = A_{H_n}Q$ である。

証明. $R(C) = A_{G_n}Q - QC = (A_{F_n} + A_{H_n})Q - \mu Q = A_{H_n}Q.$ □

命題 3.2 n -次元縦ベクトル a_i を並べた $n \times m$ -行列

$$A = (a_1, a_2, \dots, a_m)$$

に対し、

$$\|A\|_2 \leq \|a_1\|_2 + \dots + \|a_m\|_2$$

である。

証明. $x = (x_1, x_2, \dots, x_m)$ を $|x_1|^2 + \dots + |x_m|^2 = 1$ みたしているとする。

$$Ax = x_1a_1 + x_2a_2 + \dots + x_ma_m$$

であり、 $|x_i| \leq 1$ だから、

$$\begin{aligned}\|Ax\|_2 &\leq |x_1|\|a_1\|_2 + |x_2|\|a_2\|_2 + \cdots + |x_m|\|a_m\|_2 \\ &\leq \|a_1\|_2 + \|a_2\|_2 + \cdots + \|a_m\|_2.\end{aligned}\tag{3.6}$$

式 (3.2) より、 $\|A\|_2 = \max_{\|x\|=1} \|Ax\|_2$ なので、

$$\begin{aligned}\|A\|_2 &= \max_{\|x\|=1} \|Ax\|_2 \\ &\leq \max_{\|x\|=1} (\|a_1\|_2 + \|a_2\|_2 + \cdots + \|a_m\|_2) \\ &= \|a_1\|_2 + \|a_2\|_2 + \cdots + \|a_m\|_2\end{aligned}$$

となる. □

また簡単な計算ではあるが次の命題も用意しておく.

命題 3.3 実数 c_1, c_2, \dots, c_m が以下の条件

$$\begin{cases} c_1^2 + c_2^2 + \cdots + c_m^2 = 1, \\ c_k \geq c > 0 \end{cases}$$

をみたしていれば、

$$c \leq \frac{1}{\sqrt{m}}$$

が成り立つ.

証明. 不等式 $c_i^2 \geq c^2 > 0$ ($i = 1, \dots, m$) を辺ごとに足し算すると

$$c_1^2 + c_2^2 + \cdots + c_m^2 \geq mc^2$$

となり、不等式が得られる. □

これをつかって x の成分の大きさの評価を与えておく.

命題 3.4 木 T_i の k 個の葉に対する \tilde{x}_i の成分 c は $c \leq \frac{1}{\sqrt{s}}$ をみたす.

証明. 数ベクトル \tilde{x}_i はその選び方により 0 でない成分は高々 s 個で正値である. また T_i の対称性を考えると、木 T_i の k 個の葉に対する \tilde{x}_i の成分は全て等し

い. その値を c と書くことにすると, c は \tilde{x}_i の 0 ではない成分の最小値となる. なぜなら, T_i の最大固有値に対応する固有ベクトルはかならず分岐点を最大として指数的に減少する解となるからである. よって, 補題 3.3 より, $c \leq \frac{1}{\sqrt{s}}$ となる. \square

以下, 主定理を述べてその証明を行う.

定理 3.2 (主定理) 与えられたグラフ $G = G_0$ の n -細分グラフを G_n とする. さらに $k \geq 3$ とし, μ_k を k 次の分岐点をもつ部分木 T_i の最大固有値とする. さらに

$$\Lambda_{k,n} = \left\{ \lambda \in \mathbb{R}; |\mu_k - \lambda| < \frac{m}{\sqrt{\lceil \frac{n}{3} \rceil}}, \lambda \text{ は } A_{G_n} \text{ の固有値} \right\},$$

$V_\lambda = A_{G_n}$ の固有値 λ の固有空間

とおく. このとき

$$\dim \bigoplus_{\lambda \in \Lambda_{k,n}} V_\lambda \geq k \text{ 次の分岐点の個数} \quad (3.7)$$

が成り立つ.

証明. G_n は命題 3.1 の仮定をみたすので,

$$R(C) = A_H Q = (A_H \tilde{x}_1, A_H \tilde{x}_2, \dots, A_H \tilde{x}_m)$$

である. 命題 3.4 により

$$c \leq \frac{1}{\sqrt{s}}$$

であり, さらに $A_{H_n} \tilde{x}_i$ の 0 でない成分は, k 個でその値は全て等しいので,

$$\|A_{H_n} \tilde{x}_i\|_2^2 = kc^2 \leq \frac{k}{s}. \quad (3.8)$$

よって, 命題 3.2 により, 次の不等式が成立する.

$$\begin{aligned} \|R(C)\|_2 &\leq \|A_H \tilde{x}_1\| + \|A_H \tilde{x}_2\| + \dots + \|A_H \tilde{x}_m\| \\ &\leq \sqrt{\frac{k}{s}} + \dots + \sqrt{\frac{k}{s}} \\ &= m \sqrt{\frac{k}{k \lceil n/3 \rceil + 1}} \\ &< \frac{m}{\sqrt{\lceil n/3 \rceil}}. \end{aligned}$$

定理 3.1 によって, 相異なるとは限らない m 個の固有値 $\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_m$ で

$$|\mu_k - \nu_i| < \frac{m}{\sqrt{\left\lceil \frac{n}{3} \right\rceil}}$$

を満たすものがある. すなわち $\Lambda_{k,n}$ は $\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_m$ を含む. よって, 主定理がいえた. □

数値計算の結果を参照する限り, 次の主張が成立すると考えているが, 今のところ証明はない。

Conjecture 3.1 定理 3.2 の式 (3.7) は十分大きな n で等号が成立する.

第4章 パラライニンググラフについての Conjecture

パラライニンググラフ $PL(G)$ は, 元のグラフ G の各頂点 v を $\deg(v)$ 次の完全グラフ $K_{\deg(v)}$ に置きかえてできるグラフである. パラライニンググラフの完全グラフ部分を除く辺において n 細分を行ったものを n 細分パラライニンググラフといい, $PL^n(G)$ とかく (図 4.1). この章では, パラライニンググラフ $PL(G)$ の次数の分布と n 細分パラライニンググラフ $PL^n(G)$ の固有値の分布に関する Conjecture を述べる.

数値計算により G の等しい次数の頂点の数と $PL^n(G)$ の固有値の分布の関係を調べた. その結果から, $PL^n(G)$ の部分グラフ K_b の 2 より大きい固有値は 1 つしかなく (図 4.3), G_n の部分グラフ T_b のものと同じ形状である (図 4.5).

よって, 完全グラフ部分 (図 4.2) を G の分岐点に対応させるとすると, $PL^n(G)$ についても 定理 3.2 と類似である以下の Conjecture 4.1 が成り立つと考えている.

Conjecture 4.1 $k \geq 3$ とし, k 次の分岐点を m 個持つグラフ G が与えられているとする. G のパラライニンググラフ $PL(G)$ から得られる $PL^n(G)$ を n 細分パラライニンググラフとする. また μ_k を完全グラフ K_k 部分をもつ部分グラフ K_b の最大固有値とする. さらに

$$\Lambda_{k,n} = \left\{ \lambda \in \mathbb{R}; |\mu_k - \lambda| < \frac{m}{\lceil n/3 \rceil}, \lambda \text{ は } A_{PL^n(G)} \text{ の固有値} \right\},$$

$$V_\lambda = A_{PL^n(G)} \text{ の固有値 } \lambda \text{ の固有空間}$$

とおく. このとき

$$\dim \bigoplus_{\lambda \in \Lambda_{k,n}} V_\lambda = k \text{ 次の分岐点の個数}$$

が成り立つ.

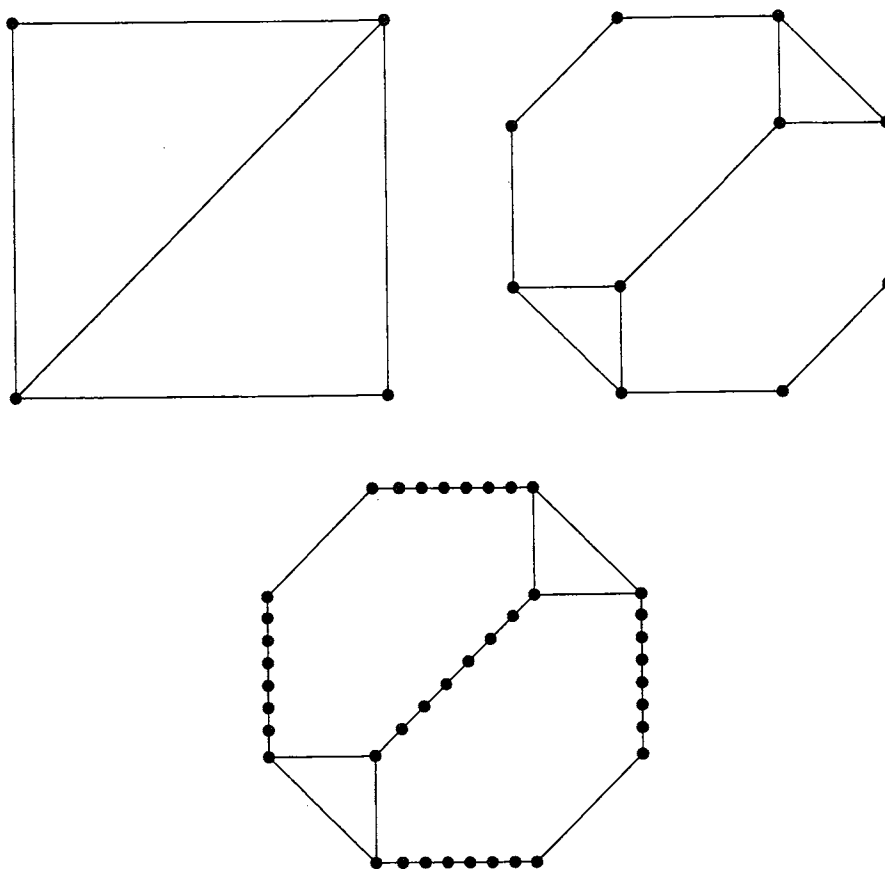


図 4.1: $n=3$ の n 細分パララインングラフ $PL^n(G)$ の例
(左上より, グラフ G , G のパララインングラフ $PL(G)$, 6 細分パララインングラフ $PL^6(G)$)

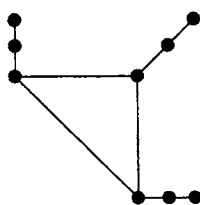


図 4.2: 6 細分パララインングラフ $PL^6(G)$ の完全グラフ部分の 1 つ K_6

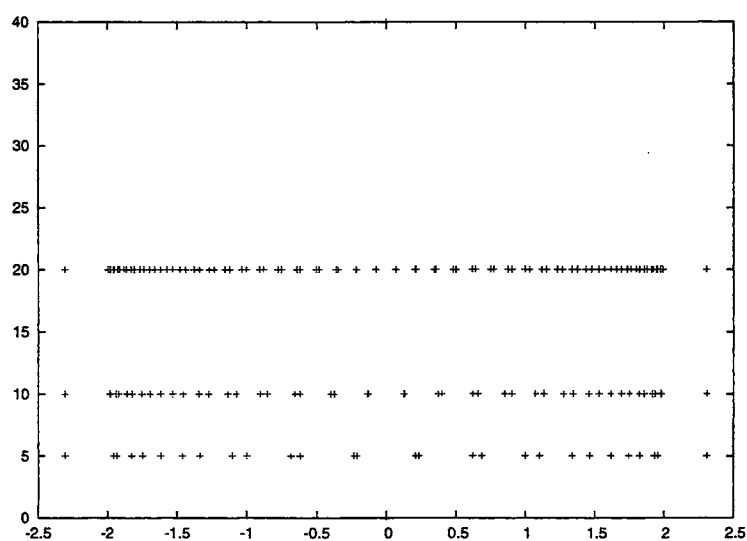


図 4.3: 図 4.1 のグラフ G の n 細分パラライングラフ $PL^n(G)$ の完全グラフ部分 1 つの固有値と細分数 n の関係 ($n = 5, n = 10, n = 20$ の 3 つについて表示)

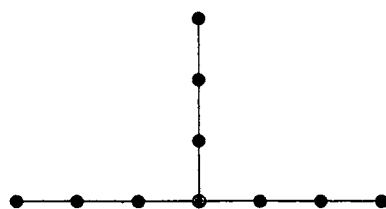


図 4.4: 図 2.2 のグラフ G_0 の 6 細分グラフ G_6 の 1 つの分岐点 b に対する T_b

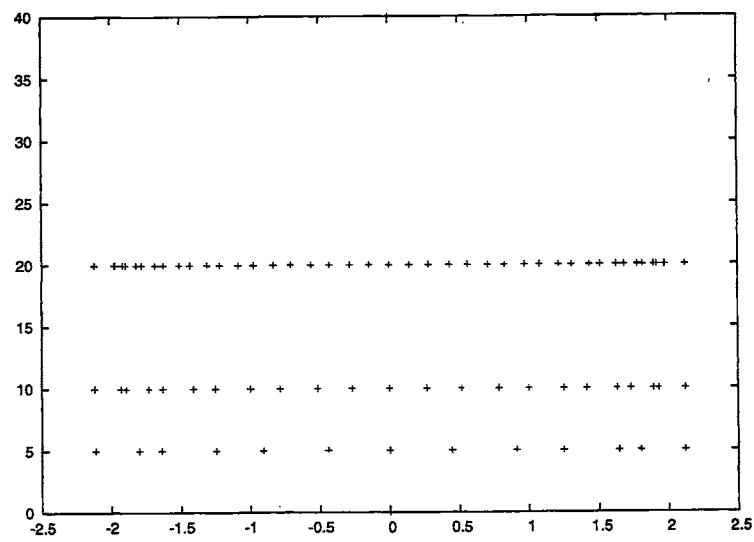


図 4.5: 図 2.2 のグラフ G_0 の n 細分グラフ G_n の 1 つの分岐点 b の固有値と細分
数 n の関係 ($n = 5$, $n = 10$, $n = 20$ の 3 つについて表示)

Acknowledgement

本報告は、著者が主任指導教員をつとめた、金沢大学自然科学研究科数物科学専攻博士前期課程の松下志保の修士論文(平成18年度提出)が元になっている。彼女の研究のきっかけは、 G と $PL(G)$ の相似性と相違をスペクトルの分布から調べることにあった。本報告では、修論では証明の不十分であった部分やいくつかの点で数値計算をもとにしていた主張の証明を補ってある。本報告に載せた数値計算やグラフなどは彼女による。

関連図書

- [1] Yu. Higuchi, *Random Walks and Isoperimetric Inequalities on Infinite graph and its line graph*, preprint.
- [2] T. Shirai, *The spectrum of infinite regular line graphs*. Trans. Amer. Math. Soc., 32(1):115-132 (1999)
- [3] T. シャトラン著, 伊理正夫, 伊理由美訳, 「行列の固有値最新の解法と応用」, シュプリンガー・フェアラーク東京 (1993)